Index

Commentationes et Relationes

Becker, C. A. L., Dahl, J. P.: A CNDO-MO Calculation of VCl_4 135
Becker, R. S., s. Michl, J., et al. 92
Bendazzoli, G. L., s. Cadioli, B., et al. 66
Biloen, P.: Calculations on Electric-Field-Induced Shifts in Ultraviolet Absorption Spectra: The Significance of Doubly Excited Configurations 365
de Brouckère, G.: Molecular Orbital Studies of Some Transition Metal Complexes . . 310
Brown, R. D., James, B. H., O'Dwyer, M. F.: Molecular Orbital Calculations on Transition Element Compounds. IV. Effect of Electrostatic Environment of Crystal Lattices 45
Brown, R. D., Lo, B. W. N.: Comments on the Approximate Calculation of Lattice Potential 369
Buenker, R. J., s. Peyerimhoff, S. D. 1

Cadioli, B., Pincelli, U., Bendazzoli, G. L., Palmieri, P.: *Ab initio* Computations on H_2S: LCAOSCF Wave Functions without *d* Orbitals 66
Chalvet, O., s. Leibovici, C. 102
Clack, D. W., Farrimond, M. S.: CNDO-Molecular Orbital Calculations of MnO_4^- and MnF_6^{4-} 373

Dahl, J. P., s. Becker, C. A. L. 135
Danilov, V. I., Zheltovsky, N. V.: Quantum Chemical Study of the π-Electronic States of the DNA Base Pairs 384
David, D.-J.: Détermination de bases de gaussiennes optimales pour les molécules. II. Fonctions contractées pour la molécule d'hydrogène. Variation avec la distance interatomique 203
Dreyfus, M., Pullmann, A.: A Non-Empirical Study of the Hydrogen Bond between Peptide Units 20
Duijneveldt, F. B. van, s. Duijneveldt-van de Rijdt, J. G. C. M. van 83
Duijneveldt-van de Rijdt, J. G. C. M. van, Duijneveldt, F. B. van: Perturbation Calculations on the Hydrogen Bond in the Water Dimer for Different Proton Acceptor Orientations 83

Earhart, Jr., C. E., s. Michl, J., et al. 92

Farrimond, M. S., s. Clack, D. W. 373
Feinberg, M. J.: Influence of Long-Range Coulombic Interactions on Binding Energy Curves of Molecule-Ions 109

Giacomini, M., Pullman, B., Maigret, B.: Recherches quantiques sur la conformation des disaccharides 347

Hässelbarth, W., s. Ruch, E., et al. 288
Hanratty, A. B., s. Minn, F. L. 390
Hartmann, H., Papula, L., Strehl, W.: Einzentrum-Modellrechnungen an Germaniumhydriden vom Typ GeH_n, GeH_n^+ und GeH_n^- ($n = 3, 4$ oder 5) 155
Hayes, E. F., s. Schwartz, M. E., et al. 98
Hedges, R. M., s. Russell, B. R. 335

I'Haya, Y. J., Nakayama, M., Yagi, Y.: Configuration Interaction Calculation of the Ground State π-Electronic Angular Momenta of the Benzene Anion and Cation . . 381

James, B. H., s. Brown, R. D., et al. 45
Jug, K.: Formulas for $\tilde{\beta}$ Parameters and Their Limitations 301

Kato, H., s. Konishi, H., et al. 71
Kobayashi, T., s. Yoshida, Z. 377
Konishi, H., Kato, H., Yonezawa, T.: The Electronic Structures of Aminopyridines and Their Mono- and Di-Protonated Cations 71
Koutecký, J., s. Michl, J., et al. 92
Kunii, T. L., s. Ohta, T., et al. 167
Kuroda, H., s. Ohta, T., et al. 167

Leibovici, C., Chalvet, O.: Calcul CNDO-CI de la structure et du spectre électronique de l'azulène 102
Levin, I. W., s. Lewis, T. P. 55

Lewis, T. P., Levin, I. W.: Absolute Infrared Intensities of Hydrocarbons 55
Lim, T.-K., Linder, B.: p-Character and the Polarizability of Molecular Hydrogen 38
Linder, B., s. Lim, T.-K. 38
Ljunggren, S., Wettermark, G.: A CNDO/2 Calculation on Stilbene 326
Lo, B. W. N., s. Brown, R. D. 369

Maigret, B., s. Giacomini, M. 347
— s. Perahia, D., et al. 121
Michl, J., Koutecký, J., Becker, R. S., Earhart, Jr., C. E.: A Note on the Parameters for Heteroatoms in Pariser-Parr-Pople (PPP) Calculations 92
Minn, F. L., Hanratty, A. B.: Parameterization in the H_3I_2 Potential Surface . . . 390

Nakayama, M., s. I'Haya, Y. J., et al. 381

O'Dwyer, M. F., s. Brown, R. D., et al. 45
Ohta, T., Kuroda, H., Kunii, T. L.: The Electronic Structures of Charge-Transfer Complexes: Application of the Semiempirical SCF-MO-CI Method 167

Palmieri, P., s. Cadioli, B., et al. 66
Papula, L., s. Hartmann, H., et al. 155
Perahia, D., Maigret, B., Pullman, B.: Molecular Orbital Calculations on the Conformation of Polypeptides and Proteins. VI. The Conformational Energy Maps and Stereochemical Rotational States of the Seryl and Threonyl Residues 121
Peyerimhoff, S. D., Buenker, R. J.: Comparison of the Molecular Structure and Spectra of Benzene and Borazine 1
Pincelli, U., s. Cadioli, B., et al. 66
Pullmann, A., s. Dreyfus, M. 20
Pullman, B., s. Giacomini, M., et al. 347
— s. Perahia, D., et al. 121

Richter, B., s. Ruch, E., et al. 288
Rothenberg, S., s. Schwartz, M. E., et al. 98
Ruch, E., Schönhofer, A.: Theorie der Chiralitätsfunktionen 225
— Hässelbarth, W., Richter, B.: Doppelnebenklassen als Klassenbegriff und Nomenklaturprinzip für Isomere und ihre Abzählung 288
Russell, B. R., Hedges, R. M.: Crystal Field Theory with Covalency 335

Sage, M. L.: Orbitals and Geminals for Particles Moving in a Harmonic Potential 179
Schönhofer, A., s. Ruch, E. 225
Schuster, P.: LCAO-MO-SCF-Calculations on the Stability and Sterochemistry of Hydrogen Bonds. VI. LCAO-MO-Calculation on Molecular Structure 212
Schwartz, M. E., Hayes, E. F., Rothenberg, S.: Theoretical Study of the Barriers to Internal Rotation in Nitrous Acid 98
Schwartz, M. E.: Calculation of the Exchange Splitting of N and O 1s Binding Energies in NO 396
Strehl, W., s. Hartmann, H., et al. 155

Wettermark, G., s. Ljunggren, S. 326

Yagi, Y., s. I'Haya, Y. J., et al. 381
Yonezawa, T., s. Konishi, H., et al. 71
Yoshida, Z., Kobayashi, T.: Electronic Spectra and Structures of Organic π-Systems. I. SCFMO Calculations of Heterocyclic Systems with the Variable Integrals Method I 377

Zheltovsky, N. V., s. Danilov, V. I. 384

Recensiones

Diehl, P., Fluck, E., Kosfeld, R.: NMR. Basic Principles and Progress/Grundlagen und Fortschritte. (Ref. H. Sillescu) 108

McWeeny, R., Sutcliffe, B. T.: Methods of Molecular Quantum Mechanics (Ref. E.-A. Reinsch) 107

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 4 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 4 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à de courts intervalles, suivant les articles reçus. En général un volume se compose de 4 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que des ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 19

Index

Fasc. 4

Commentationes

JUG, K.: Formulas for $\tilde{\beta}$ Parameters and Their Limitations 301

DE BROUCKÈRE, G.: Molecular Orbital Studies of Some Transition Metal Complexes . . 310

LJUNGGREN, S., WETTERMARK, G.: A CNDO/2 Calculation on Stilbene 326

RUSSELL, B. R., HEDGES, R. M.: Crystal Field Theory with Covalency 335

GIACOMINI, M., PULLMAN, B., MAIGRET, B.: Recherches quantiques sur la conformation des disaccharides 347

Quantum Mechanics Applied to Conformational Studies of Disaccharides

BILOEN, P.: Calculations on Electric-Field-Induced Shifts in Ultraviolet Absorption Spectra: The Significance of Doubly Excited Configurations 365

Relationes

BROWN, R. D., LO, B. W. N.: Comments on the Approximate Calculation of Lattice Potential 369

CLACK, D. W., FARRIMOND, M. S.: CNDO-Molecular Orbital Calculations of MnO_4^- and MnF_6^{4-} 373

YOSHIDA, Z., KOBAYASHI, T.: Electronic Spectra and Structures of Organic π-Systems. I. SCFMO Calculations of Heterocyclic Systems with the Variable Integrals Method I 377

I'HAYA, Y. J., NAKAYAMA, M., YAGI, Y.: Configuration Interaction Calculation of the Ground State π-Electronic Angular Momenta of the Benzene Anion and Cation . . 381

DANILOV, V. I., ZHELTOVSKY, N. V.: Quantum Chemical Study of the π-Electronic States of the DNA Base Pairs 384

MINN, F. L., HANRATTY, A. B.: Parameterization in the H_2I_2 Potential Surface . . . 390

SCHWARTZ, M. E.: Calculation of the Exchange Splitting of N and O 1*s* Binding Energies in NO 396

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237

Telefon (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1970